

**АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ
НАНОКОМПОЗИТОВ**

С.В. Люлин

Федеральное государственное учреждение науки Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук.

*199004, Санкт-Петербург, Большой пр. 31
s.v.lyulin@gmail.com*

В докладе представлен обзор современного состояния атомистического компьютерного моделирования полимерных нанокompозитов. Основное внимание уделено системам, в которых связующими являются термопластичные полиимиды, активно исследуемые и синтезируемые в ИВС РАН.

На основе результатов микросекундного компьютерного моделирования решены не только методологические вопросы, связанные с созданием равновесных образцов, корректным описанием парциальных зарядов, выбором скоростей охлаждения и растяжения при расчете теплофизических и механических свойств, но и установлены механизмы, определяющие изменение свойств систем при изменении химической структуры. Показана способность углеродных наночастиц инициировать кристаллизацию полимерных связующих при значениях температур, близких к экспериментальным. Показаны перспективы использования методов молекулярной динамики, связанные с высокой предсказательной способностью данного метода исследования при разработке новых композиционных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках Договора № 14.Z50.31.0002 (грант Правительства Российской Федерации в соответствии с Постановлением № 220 от 9 апреля 2010 г.).